

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1992/93

April 1993

KUA 275 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Masa : (2 jam)

Jawab sebarang EMPAT soalan.

Hanya EMPAT soalan yang pertama akan diperiksa.

Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi LIMA soalan semuanya (5 muka surat).

1. (a) Tentukan simbol sebutan keadaan asas bagi atom Zn
(nombor atom = 30) dan molekul CO. (8 markah)

- (b) Tentukan simbol sebutan keadaan teruja bagi
molekul NO apabila ia mempunyai konfigurasi
elektron $[]3s\sigma_g^1$. Adakah peralihan elektron dari
keadaan asas ke keadaan ini dibenarkan?
(9 markah)

- (c) Apakah konfigurasi elektron molekul CO pada
keadaan teruja yang terdekat dengan keadaan asas
serta mudah dicapai tanpa melanggar peraturan
pemilihan.

(8 markah)

2. (a) Spektrum inframerah-dekat bagi karbon monoksida ($C^{12}O^{16}$) menunjukkan satu jalur yang jelas pada 2144 cm^{-1} . Kira frekuensi getaran dasarnya, pemalar daya dan tenaga takat sifar bagi molekul ini.

(9 markah)

- (b) Dengan menganggap jarak ikatan bagi $C^{12}O^{16}$ dan $C^{13}O^{18}$ itu sama kira kedudukan jalur getaran yang anda jangka bagi molekul $C^{13}O^{18}$.

(4 markah)

- (c) Tiga garisan berturutan dalam spektrum putaran tulen $H^{79}Br$ diperhatikan pada 84.544 , 101.355 dan 118.112 cm^{-1} .

(i) Tetapkan garisan-garisan itu dengan peralihan-peralihan $J'-J$ yang sesuai.

(ii) Tentukan pemalar putaran, B_0 , dan pemalar erut pengemparan, D_0 .

(iii) Kira frekuensi getaran asas bagi molekul tersebut.

(12 markah)

3. Nombor gelombang bagi satu jalur dalam spektrum getaran-putaran boleh diwakili oleh persamaan

$$\bar{\nu} = \bar{\nu}_0 + BJ'(J' + 1) - BJ''(J'' + 1)$$

apabila salingtindak antara getaraan dan putaran diabaikan. J'' dan J' masing-masing mewakili nombor kuantum putaran pada getaran asas dan getaran teruja. Peralihan boleh berlaku dari $J'' = J$ ke $J' = J + 1$ ($\Delta J = +1$) atau $J'' = J$ ke $J' = J - 1$ ($\Delta J = -1$). Berdasarkan maklumat-maklumat ini terbitkan hubungan nombor gelombang jalur getaran-putaran dan nombor kuantum J . Seterusnya kira

- (a) frekuensi getaran asas ν_0 ,
- (b) pemalar putaran B dan
- (c) jarak ikatan molekul $H^{35}Cl$

jika sebahagian daripada jalur-jalur didapati seperti berikut:

	J	$\bar{\nu}$
cabang R	3	2963.24
	2	2944.89
	1	2925.78
	0	2906.25
cabang P	1	2865.09
	2	2843.56
	3	2821.49
	4	2798.78

Jalur-jalur yang manakah memberi keamatan maksimum pada 300 K?

(25 markah)

4. (a) Berikan sedikit penjelasan mengenai prinsip asas spektroskopi Raman dan nyatakan perbezaannya dengan spektroskopi getaran-putaran.

(10 markah)

- (b) Alkena menunjukkan frekuensi Raman pada 1642 cm^{-1} , yang disebabkan oleh regangan $\text{C}=\text{C}$. Kira jarak gelombang di mana jalur tersebut didapati jika garis cahaya 4358 \AA digunakan sebagai punca cahaya.

(5 markah)

- (c) Suatu molekul A_2B_2 mempunyai jalur spektrum inframerah dan Raman seperti dalam jadual berikut:

cm^{-1}	Inframerah	Raman
3374	-	Kuat
3287	sangat kuat, ada cabang PR	-
1973	-	Sangat kuat
729	sangat kuat, ada cabang PQR	-
612	-	Lemah

Apakah kesimpulan yang boleh anda buat mengenai struktur molekul itu?

(10 markah)

5. (a) Lakarkan rupabentuk spektrum NMR bagi sistem sebatian AMX yang mana ketiga-tiga proton itu mempunyai anjakan kimia yang sangat berbeza ($\delta_A = 100$, $\delta_B = 200$ dan $\delta_X = 700$ Hz). Ketiga-tiga proton ini mengalami pengkupelan yang mana pemalar-pemalar pengkupelannya ialah $J_{AB} = 9$, $J_{AX} = 7$ dan $J_{BX} = 3$ Hz.

(10 markah)

- (b) Lakarkan spektrum ESR bagi satu elektron tak berpasangan yang salingtindak dengan tiga proton dalam keadaan-keadaan yang berikut:

- (i) ketiga-tiga proton adalah setara,
- (ii) ketiga-tiga proton tak setara dan
- (iii) dua proton setara dan yang ketiga tak setara.

(15 markah)

ooo0ooo

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Pusat Pengajian Sains Kimia

Pemalar Asas dalam Kimia Fizik

<u>Simbol</u>	<u>Keterangan</u>	<u>Nilai</u>
N_A	Nombor Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
F	Pemalar Faraday	$96,500 \text{ C mol}^{-1}$, atau coulomb per mol, elektron
e	Cas elektron	$4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$ $1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$ atau coulomb
m_e	Jisim elektron	$9.11 \times 10^{-28} \text{ g}$ $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
m_p	Jisim proton	$1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
h	Pemalar Planck	$6.626 \times 10^{-27} \text{ erg s}$ $6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
c	Halaju cahaya	$3.0 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$ $3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
R	Pemalar gas	$8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.082 \text{ l atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
k	Pemalar Boltzmann	$1.380 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ $1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$
g		981 cm s^{-2} 9.81 m s^{-2}
1 atm		76 cmHg $1.013 \times 10^6 \text{ dyne cm}^{-2}$ $101,325 \text{ N m}^{-2}$
$2.303 \frac{RT}{F}$		0.0591 V , atau volt, pada 25°C

Berat Atom yang Berguna

H = 1.0	C = 12.0	I = 126.9	Fe = 55.8	As = 74.9
Br = 79.9	Cl = 35.5	Ag = 107.9	Pb = 207.0	Xe = 131.1
Na = 23.0	K = 39.1	N = 14.0	Cu = 63.5	F = 19.0
O = 16.0	S = 32.0	P = 31.0	Ca = 40.1	Mg = 24.0